



Universidad Nacional Mayor de San Marcos

Universidad del Perú. Decana de América

Facultad de Química e Ingeniería Química

Escuela Profesional de Química

**Fisicoquímica del neurotransmisor dopamina y su
precursor L-DOPA utilizando métodos teóricos y
experimentales**

TESIS

Para optar el Título Profesional de Química

AUTOR

Nancy Mariela CHALLAPA VELÁSQUEZ

ASESOR

Aldo Javier GUZMÁN DUXTAN

Juan Zenón DÁVALOS PRADO

Lima, Perú

2018



Reconocimiento - No Comercial - Compartir Igual - Sin restricciones adicionales

<https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/>

Usted puede distribuir, remezclar, retocar, y crear a partir del documento original de modo no comercial, siempre y cuando se dé crédito al autor del documento y se licencien las nuevas creaciones bajo las mismas condiciones. No se permite aplicar términos legales o medidas tecnológicas que restrinjan legalmente a otros a hacer cualquier cosa que permita esta licencia.

Referencia bibliográfica

Challapa, N. (2018). *Fisicoquímica del neurotransmisor dopamina y su precursor L-DOPA utilizando métodos teóricos y experimentales*. [Tesis de pregrado, Universidad Nacional Mayor de San Marcos, Facultad de Química e Ingeniería Química, Escuela Profesional de Química]. Repositorio institucional Cybertesis UNMSM.

98-P

635



UNIVERSIDAD NACIONAL MAYOR DE SAN MARCOS
(Universidad del Perú, DECANA DE AMÉRICA)

FACULTAD DE QUÍMICA E INGENIERÍA QUÍMICA

Central: 019 7500 anexos 1235 - Telefax: 1250
Calle Germán Amodeo 375 - Lima 5
"Año del Diálogo y la Reconciliación Nacional"
"Decenio de la Igualdad de Oportunidades para Mujeres y Hombres"

ESCUELA PROFESIONAL DE QUÍMICA

ACTA DE SUSTENTACIÓN DE TESIS

Los señores miembros del Jurado, nombrados por la Dirección de la Escuela Académico Profesional de Química, bajo la Presidencia del Dr. NELSON JUVENAL TAPIA HUANAMBAL (Presidencia), el Quím. MARCO VICENTE GUERRERO AQUINO (Miembro) y el Quím. ALDO JAVIER GUZMÁN DUXTAN (Asesor), habiendo presentado para tal efecto la TESIS, titulada "FISICOQUÍMICA DEL NEUROTRANSMISOR DOPAMINA Y SU PRECURSOR L-DOPA UTILIZANDO MÉTODOS TEÓRICOS Y EXPERIMENTALES", después de SUSTENTADA Y APROBADA la TESIS elaborada por la Bachiller en Química: NANCY MARIELA CHALLAPA VELÁSQUEZ, para optar el TÍTULO PROFESIONAL de QUÍMICA, acordaron calificarlo con la NOTA de:

Dieciséte

(LETRA)

17

(NÚMERO)

Ciudad Universitaria, 18 de mayo de 2018.

Nelson Juvenal Tapia Huanambal
Dr. NELSON JUVENAL TAPIA HUANAMBAL
PRESIDENTE

Marco Vicente Guerrero Aquino
Quím. MARCO VICENTE GUERRERO AQUINO
MIEMBRO

Aldo Javier Guzmán Duxtán
Quím. ALDO JAVIER GUZMÁN DUXTAN
ASESOR

Julio César Santiago Contreras
Dr. JULIO CÉSAR SANTIAGO CONTRERAS
DIRECTOR DE LA E.P. DE QUÍMICA



FISICOQUIMICA DEL NEUROTRANSMISOR DOPAMINA Y SU PRECURSOR L-DOPA UTILIZANDO MÉTODOS TEÓRICOS Y EXPERIMENTALES

Autor: CHALLAPA VELASQUEZ, NANCY MARIELA

Asesor: Dr. GUZMAN DUXTAN, ALDO JAVIER

Co-Asesor: Dr. DÁVALOS PRADO, JUAN ZENÓN

RESUMEN

En el presente trabajo se han estudiado propiedades de estabilidad termodinámica y reactividad por transferencia protónica intrínsecas (en fase gas) del neurotransmisor dopamina y su precursor L-DOPA. Utilizando tanto métodos experimentales como teóricos (DFT y *ab initio*), determinamos:

- Computacionalmente: Entalpías de formación, $\Delta_f H_m^0(g)$, de las especies neutras estudiadas, empleando metodologías termoquímicas como Reacciones de atomización (a niveles G3 y G4) y Reacciones isodésmicas (B3LYP).
- Experimentalmente: Afinidad protónica *PA* y basicidad *GB* de la dopamina y la acidez (*GA*) de la L-DOPA; aplicando el Método Extendido de Cooks (EKCM) a los resultados obtenidos utilizando un espectrómetro de masas de triple cuadrupolo (MS-TQ) con fuente de ionización por electrospray (ESI). Las propiedades estructurales (incluyendo análisis poblacional) y energéticas de las especies consideradas fueron calculadas computacionalmente al nivel B3LYP; éstas reprodujeron bastante bien los valores experimentales obtenidos.

Palabras claves: Neurotransmisor, dopamina, L-DOPA, acidez, basicidad, afinidad protónica, MS-ESI, Método cinético extendido, DFT, B3LYP, G3-G4, cálculos computacionales.

PHYSICAL CHEMISTRY PROPERTIES OF NEUROTRANSMITTER DOPAMINE AND ITS PRECURSOR L-DOPA USING EXPERIMENTAL AND THEORETICAL METHODS

Author: CHALLAPA VELASQUEZ, NANCY MARIELA

Advisor: Dr. GUZMAN DUXTAN, ALDO JAVIER

CO-Advisor: Dr. DAVALOS PRADO JUAN ZENON

SUMMARY

In the present work, thermodynamic stability and intrinsic proton transfer reactivity (in gas phase) properties of the neurotransmitter dopamine and its precursor L-DOPA have been studied. Using both experimental and theoretical methods (DFT and *ab initio*), we determine:

- Computationally: Standard enthalpies of formation in the gas phase, $\Delta_f H_m^0(g)$, of the neutral species studied, using thermochemical methodologies such as atomization reactions (at G3 and G4 levels of theory) and isodesmic reactions (at B3LYP level).
- Experimentally: Proton affinity *PA* and basicity *GB* of dopamine and acidity (*GA*) of L-DOPA; applying the Extended Cook Method (EKCM) to the results obtained using a triple quadrupole mass spectrometer (TQ-MS) with an electrospray ionization source (ESI). The structural (including population analysis) and energetic properties of the species considered were calculated computationally at the B3LYP level; they reproduced very well the obtained values.

Key words: Neurotransmitter, dopamine, L-DOPA, acidity, basicity, proton affinity, MS-ESI, Extended Kinetic Method, DFT, B3LYP, G3-G4, computational calculations.